

# 原子膜への不純物ドーピングに関する研究

東京工業大学大学院理工学研究科 藤本義隆

**目的** 原子膜物質への異種原子ドーピングによる安定性と電子特性を明らかにすること。

**内容** 第一原理密度汎関数理論に基づき、グラフェンへのホウ素および窒素をドーピングした系のエネルギー論やエネルギーバンド構造を計算した。

**結果** 単層よりも二層系グラフェンの方が、ホウ素・窒素ともにドーピングしやすいことが分かった。また、走査型トンネル電子顕微鏡像は、ホウ素と窒素ドーピングで異なることが分かった。

利用計算機	SX-ACE
ノード時間	250時間
使用メモリ	20GB
ベクトル化率	89%
並列化	2並列

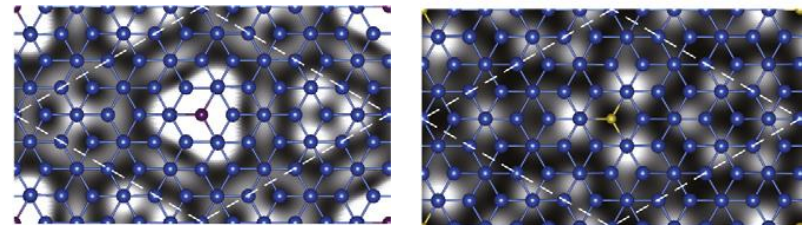


図 走査型トンネル電子顕微鏡像。ホウ素ドーピング(左)、窒素ドーピング(右)。